

Расчёт оптических функций полупроводников и диэлектриков по дисперсионному соотношению Крамерса-Кронига

А. В. Леонтьев

Белорусский государственный университет, Минск; e-mail:avl141055@gmail.com

Представлена программа для расчета оптических функций, частот продольных и поперечных оптически активных фононов полупроводниковых и диэлектрических материалов из спектров коэффициента отражения по соотношению Крамерса-Кронига.

Ключевые слова: соотношение Крамерса-Кронига, коэффициент преломления, коэффициент поглощения.

Введение

Соотношения Крамерса—Кронига (КК) [1–3] широко используются в различных разделах теоретической физики для восстановления одной из частей комплексной диэлектрической проницаемости по известной второй части, расчета оптических функций кристаллов из измерений коэффициента отражения в широкой области спектра, восстановления действительной части функции Грина из ее мнимой части, получаемой из зонных расчетов, а также в ряде других задач, непосредственно связанных с оптикой и физикой твердого тела.

Разработка программы реализации соотношения Крамерса-Кронига

Для оптических приложений соотношение КК принято представлять в виде:

$$\varphi(x_0) = \frac{x_0}{\pi} \left[\int_0^a \frac{\ln R(x) dx}{x_0^2 - x^2} + P \int_a^b \frac{\ln R(x) dx}{x_0^2 - x^2} + \int_b^\infty \frac{\ln R(x) dx}{x_0^2 - x^2} \right] = \varphi_1(x_0) + \varphi_2(x_0) + \varphi_3(x_0), \quad (1)$$

где $\varphi_2(x_0)$ – вклад в фазу отраженной волны от экспериментально исследованной области спектра, $\varphi_1(x_0)$ и $\varphi_3(x_0)$ – вклад в фазу отраженной волны от неисследованных частей спектра, $R(x)$ – коэффициент отражения.

Основная проблема заключается в расчете $\varphi_2(x_0)$, для чего использовался разработанный в [4] метод кубических сплайнов. Ниже (рис. 1) приведена блок-схема программы, написанной на C++, реализующая преобразование КК для расчета оптических функций полупроводников и диэлектриков.

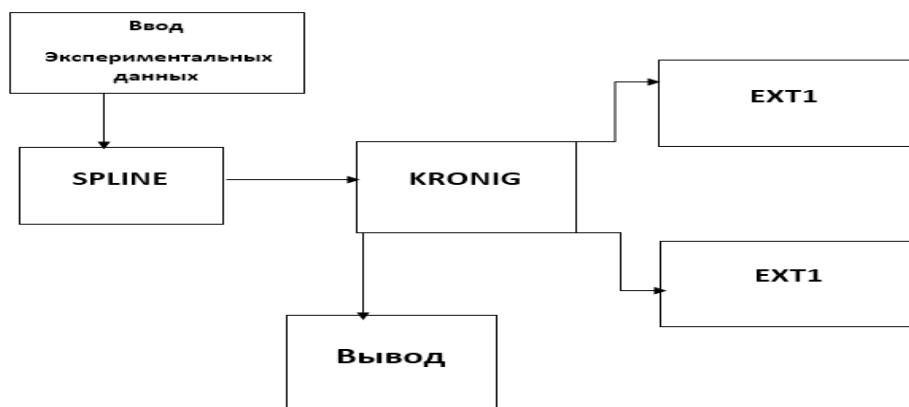


Рис.1. – Блок-схема программы Kronig.

Особенностью представленного программного комплекса является применение кубических сплайнов для интерполяции экспериментальных данных внутри измеренного диапазона коэффициента отражения, что значительно повышает точность расчетов. Экспериментальный спектр, полученный в диапазоне (a, b) содержит N -точек и на участках (x_i, x_{i+1}) аппроксимируется кубическими сплайнами $y = \ln R(x)$:

$$y = y_i + B_i(x - x_i) + C_i(x - x_i)^2 + D_i(x - x_i)^3, \quad (2)$$

где B_i, C_i, D_i – коэффициенты кубического сплайн, вычисляемые подпрограммой **SPLINE**. Применение сплайнов более высокой степени нецелесообразно.

Далее, данные обрабатываются основной программой **KRONIG**, которая на основе формул, приведенных в [4], рассчитывает $\varphi_2(x_0)$. Значения $\varphi_1(x_0)$ и $\varphi_3(x_0)$ рассчитываются с помощью экстраполяционных подпрограмм **EXT1** и **EXT2**. В представленном варианте программы значения $R(x)$ в диапазонах $(0, a)$ и (b, ∞) равны константам $R(a)$ и $R(b)$. В дальнейшем предполагается модернизировать эти аппроксимации, а также разработать эффективную программы реализации разностного метода КК [4], взяв в качестве привязочной точки значения, полученные методом лазерной эллипсометрии.

Вывод расчетных значений коэффициентов преломления (n), поглощения (k), действительной и мнимой частей комплексной диэлектрической проницаемости сделан в виде, удобном для последующей обработке в редакторе **ORIGIN**.

Для для определения частот ТО-фононов используются два метода:

а) по положению максимума модуля $1/\varepsilon^*$,

б) по положению максимумов мнимой части ε'' комплексной диэлектрической проницаемости.

Для ЛО-фононов :

а) по положению нулей действительной части комплексной диэлектрической проницаемости;

б) по положению пиков мнимой части обратной диэлектрической проницаемости.

В качестве тестов программы Kronig мы выбрали расчет оптических параметров ряда соединений $A^{III}B^V$: GaAs, InAs и GaP. Экспериментальные данные по спектрам коэффициента отражения $R(x)$ взяты из [5]. Ниже (на рис. 2, рис. 3) приведены рассчитанные по программе Kronig и взятые из книги [5] значения n и k в диапазоне длин волн 0,049–1 мкм для GaAs.

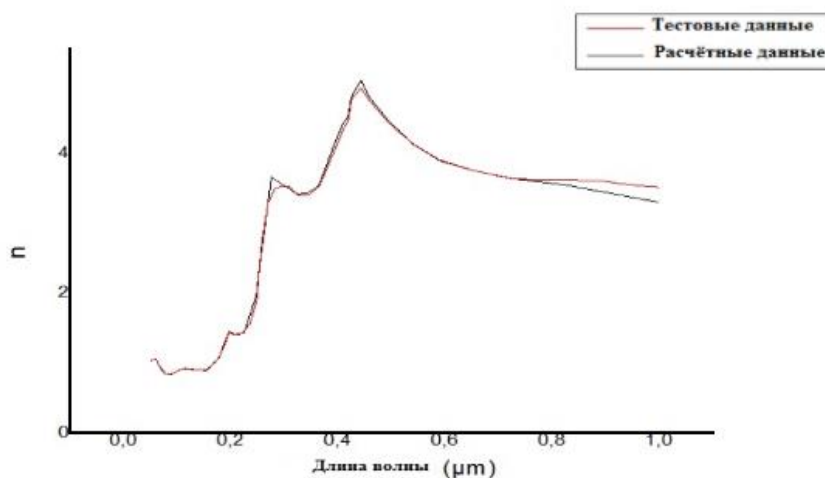


Рис.2. – Зависимость коэффициента преломления от длины волны для GaAs.

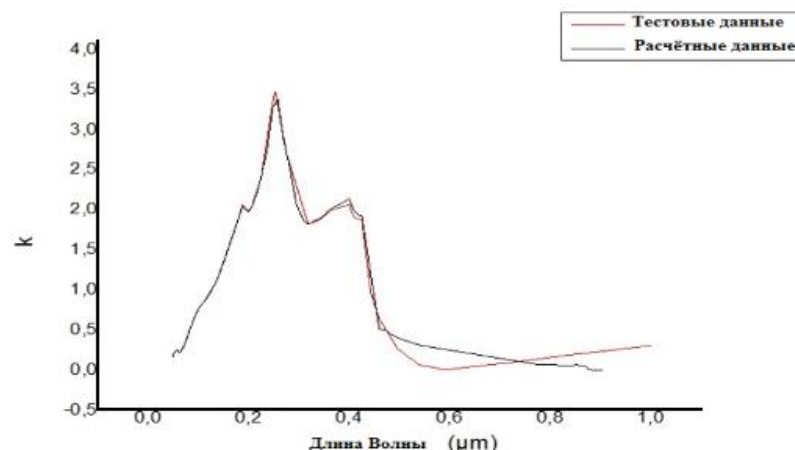


Рис.3. – Зависимость коэффициента поглощения от длины волны для GaAs.

Результаты сравнения показывают, что разница в значениях рассчитываемых величин отмечается только в конце диапазона длин волн. Это вызвано проблемами экстраполяции коэффициента отражения в неисследованных областях спектра.

Заключение

Разработана простая и удобная для использования программа реализации соотношения Крамерса-Кронига с применением кубических сплайнов. Проведен тестовый расчет оптических функций ряда полупроводниковых соединений. Показано хорошее совпадение с имеющимися в литературе экспериментальными данными.

Литература

1. В.Б.Тимофеев. Оптическая спектроскопия объемных полупроводников и наноструктур: Учебное пособие. СПб.: Издательство «Лань», 2014. 512 с.
2. Lucarini V., Saarinen J.J., Peiponen K., and Vartiainen E. Kramers-Kronig Relations in Optical Materials Research. Berlin: Springer, 2005. DOI:10.1007/b138913-2005. 162 p.
3. Kozak M. I., Zhikharev V. N., Puga P. P., and Loya V. Yu. The Kramers-Kronig Relations: Validation via Calculation Technique. International Journal of Innovative Science, Engineering & Technology. 2017. Vol. 4. Issue 12. P. 152–159.
4. Дорожкин Н. Н., Леонтьев А. В. Применение соотношения Крамерса-Кронинга в физике твердого тела и его реализация. Томск, 1986, 20 с.
5. Уиллардсон Р., Бир А.. Оптические свойства полупроводников. Из-во “МИР”, Москва, 1970, 483 с.

Calculation of optical functions of semiconductors and dielectrics by the Kramers-Kronig dispersion relations

A. V. Leontyev

¹Belarussian State University, Minsk; e-mail:avl141055@gmail.com

We present a program for calculating optical functions, frequencies of longitudinal and transverse optically active phonons of semiconductor and dielectric materials from reflectance spectra using the Kramers-Kronig relations.

Keywords: Kramers-Kronig ratio, refractive index, absorption coefficient.